一次元準結晶の電子状態とLie代数(クエイサイクリスタルの構造と物性,科研費研究会報告)

大沢, 一人

一次元準結晶の電子状態とＬｉｅ代数　　　東大・理・大沢一人

一次元準結晶のモデルはフィボナッチの０、１列である。１を井戸、０を壁に置き換えたようなポテンシャルを想定しこれをフィボナッチ系と呼ぶことにする。図１。私はこのようなポテンシャル中の電子のバンド構造を研究した。

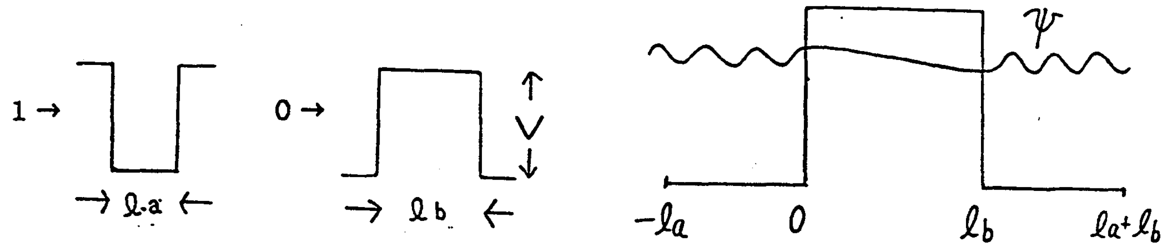

図１

一次元系を調べる有力な方法は伝送行列の方法である。例として壁に対応する伝送行列をつくってみよう。Ｓｃｈｒöｄｉｎｇｅｒ方程式を

$$\{-\nabla^2+v(x)\}\Psi(x)=E\Psi(x) \qquad \text{但し}\ v(x)=\begin{cases} V & \text{壁} \\ 0 & \text{井戸} \end{cases}$$

一次元では波動関数は独立な２つの固有関数の一次結合である。$E<V$　の時は

$$[-\ell_a,\,0] \qquad \Psi(x)=a_1\cos(kx)+b_1\sin(kx)$$

$$[0,\,\ell_b] \qquad \Psi(x)=a_2\exp(\varepsilon x)+b_2\exp(-\varepsilon x)$$

$$[\ell_b,\,\ell_a+\ell_b] \qquad \Psi(x)=a_3\cos(kx)+b_3\sin(kx)$$

但し　$k\equiv\sqrt{E}$　　$\varepsilon\equiv\sqrt{V-E}$

$\Psi(x)$ と $\nabla\Psi(x)$ は連続だから $x=0$、$x=\ell_b$ で a_i, b_i には次のような関係がある。

$x=0$

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & k \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a_1 \\ b_1 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ \varepsilon & -\varepsilon \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a_2 \\ b_2 \end{pmatrix}$$

$x=\ell_b$

$$\begin{pmatrix} \cos(k\ell_b) & \sin(k\ell_b) \\ -k\sin(k\ell_b) & k\cos(k\ell_b) \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a_3 \\ b_3 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} \exp(\varepsilon\ell_b) & \exp(-\varepsilon\ell_b) \\ \varepsilon\exp(\varepsilon\ell_b) & -\varepsilon\exp(-\varepsilon\ell_b) \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a_2 \\ b_2 \end{pmatrix}$$

$\begin{pmatrix} a_2 \\ b_2 \end{pmatrix}$ を消去すると壁１つに対応する伝送行列を得る．これをＢとする．

$$B\equiv\begin{pmatrix} \cosh(\varepsilon\ell_b) & \sinh(\varepsilon\ell_b)/\varepsilon \\ \varepsilon\sinh(\varepsilon\ell_b) & \cosh(\varepsilon\ell_b) \end{pmatrix}$$

$E>V$ の時は $\varepsilon \equiv \sqrt{E-V}$ として壁に対する伝送行列は

$$B \equiv \begin{pmatrix} \cos(\varepsilon \, \ell_b) & \sin(\varepsilon \, \ell_b)/\varepsilon \\ -\varepsilon \sin(\varepsilon \, \ell_b) & \cos(\varepsilon \, \ell_b) \end{pmatrix}$$

である。まったく同様に井戸に対する伝送行列も得られそれをAとする。

$$A \equiv \begin{pmatrix} \cos(k \, \ell_a) & \sin(k \, \ell_a)/k \\ -k\sin(k \, \ell_a) & \cos(k \, \ell_a) \end{pmatrix}$$

伝送行列A　Bは n_a 、n_b を任意な整数とすると次のようにかける。

$$A=(-1)^{n}\exp\left(\frac{\sqrt{E}\,\ell_a - n_a\,\pi}{\sqrt{E}}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -E & 0 \end{pmatrix}\right) \qquad B=(-1)^{n}\exp\left(\frac{\sqrt{E-V}\,\ell_b - n_b\,\pi}{\sqrt{E-V}}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ V-E & 0 \end{pmatrix}\right)$$

$M=\exp(X)$ の時MをLie群、XをLie環という。n_a 、n_b を自由にとれるからLie環は多くの表し方がある。これをLie環の多価性と呼ぶことにする。そこで

$$\alpha=\frac{\sqrt{E}\,\ell_a - n_a\,\pi}{\sqrt{E}}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -E & 0 \end{pmatrix} \qquad \beta=\frac{\sqrt{E-V}\,\ell_b - n_b\,\pi}{\sqrt{E-V}}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ V-E & 0 \end{pmatrix}$$

とおいてこれからは伝送行列 e^{α} e^{β} を使いバンド構造を説明する。ハウスドルフの公式を何度も使い

$$\begin{aligned} M &= ABAABABA\cdots \\ &= e^{\alpha}e^{\beta}e^{\alpha}e^{\alpha}e^{\beta}e^{\alpha}e^{\beta}e^{\alpha}\cdots \\ &= e^{\gamma} \end{aligned}$$

として γ が得られたとする。$|\mathrm{Tr}(M)|\leq 2$ の時固有エネルギーをもつことができる。ところで $\det(M)=1$ だから $|\mathrm{Tr}(M)|\leq 2$ と $\det(\gamma)\geq 0$ は同値である。そこで $\det(\gamma)\geq 0$ は固有エネルギーをもつかどうかの判別式になる。n世代のフィボナッチ系の伝送行列を M_n、n番目のフィボナッチ数を f_n、高次の交換項を O_n とする。リカージョン公式より

$$\begin{aligned} M_{n+2} &= M_{n+1}\,M_n \\ &= \exp(f_n\alpha + f_{n-1}\beta + O_{n+1})\exp(f_{n-1}\alpha + f_{n-2}\beta + O_n) \\ &= \exp\{(f_n+f_{n-1})\,\alpha + (f_{n-1}+f_{n-2})\,\beta \\ &\qquad + 1/2\,(f_n f_{n-2} - f_{n-1}^2)\,[\alpha,\beta] + O_{n+2}\} \end{aligned}$$

$f_n f_{n-2} - f_{n-1}^2 = (-1)^{n-1}$ である。だから γ の高次の交換項は小さいと仮定する。

$$\therefore \gamma \propto \frac{\sqrt{5}+1}{2}\alpha + \beta$$

$n=0$ を代入し $\det(\gamma)\geq 0$ よりフィボナッチ系の最低固有値がわかる。

$$E \geq \frac{\ell_b\,V}{\frac{\sqrt{5}+1}{2}\ell_a + \ell_b}$$

$\ell a=\ell b$ という井戸と壁の長さが等しい時のバンド構造は図２であり最低固有値は

$$E \geq \frac{2}{\sqrt{5}+3} V \fallingdotseq 0.382V$$

Ｌｉｅ環の多価性のためある程度バンドギャップも説明できる。最低固有値の時と同様高次の交換項を無視することにする。$\ell a=\ell b=1$ の時は $n_a=n_b=n$ とすると $E=(n\pi)^2$ 付近のバンドギャップを説明できる。バンドギャップとは２本の曲線にはさまれた領域である。$\det(\gamma)=0$ となるのは

$$\frac{\sqrt{5}+1}{2}\frac{\sqrt{E}-n\pi}{\sqrt{E}}+\frac{\sqrt{E-V}-n\pi}{\sqrt{E-V}}=0 \qquad \text{——(1)}$$

$$\frac{\sqrt{5}+1}{2}\sqrt{E}(\sqrt{E}-n\pi)+\sqrt{E-V}(\sqrt{E-V}-n\pi)=0 \qquad \text{——(2)}$$

の２式のどちらかが成り立つところであるがこの２式は $E=(n\pi)^2$ 付近のバンドエッジを表している。図３は $n=1$ の場合 $E=\pi^2$ 付近にできるギャップをみたものである。

Ｌｉｅ環の非交換項だけとるという荒っぽい近似であるがバンド構造とよく一致している。これはフィボナッチ系の特徴である。

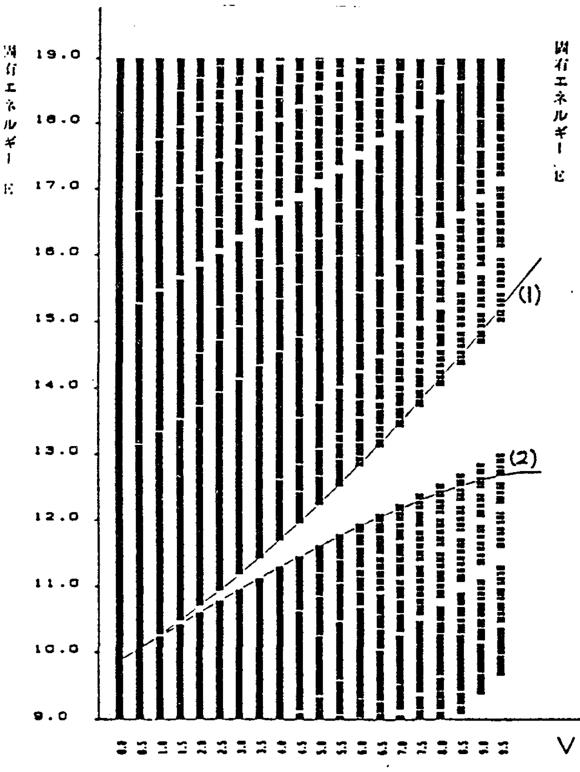

図３

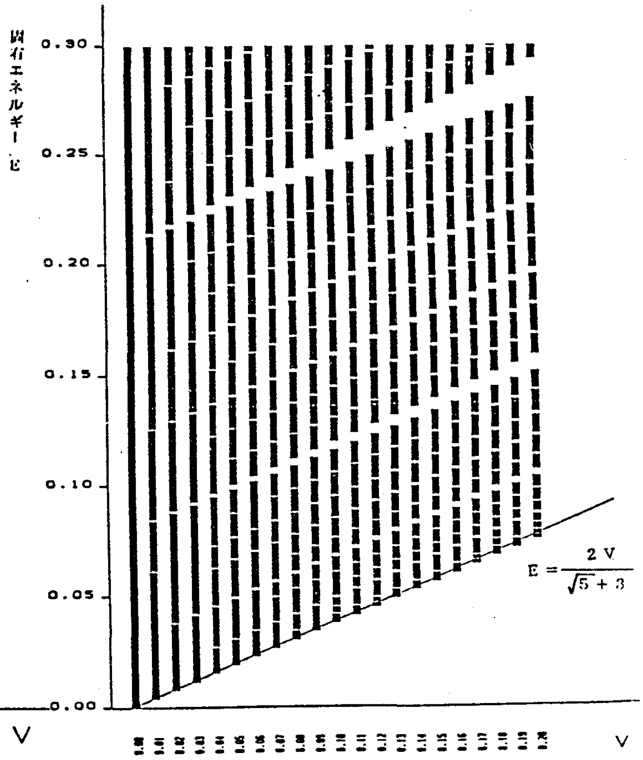

図２